

ABSTRAK

Studi terhadap aplikasi dari metode REMD (Replica Exchange Molecular Dynamic) untuk peningkatan pengambilan contoh konformasi protein p53 telah dilakukan. Pengambilan contoh konformasi protein yang benar diperlukan untuk menentukan stabilitas konformasi protein. Stabilitas konformasi protein merupakan hal penting menyangkut fungsi protein tersebut. Proses pengambilan contoh konformasi dapat dilakukan dengan metode simulasi MD, REMD, dan lain - lainnya. Penelitian ini dilakukan dengan modul REMD dalam paket software AMBER11. Protein p53 *wild-type* (kode PDB: 1TSR) disimulasikan selama 140 ps per replika, dimulai dari tahapan ekuilibrasi dan hasilnya dibandingkan dengan 60 ps per replika dari trajektori REMD yang dimulai bentuk p53 *snapshot* MD pada 310 ns. Penelitian ini difokuskan untuk memahami efektivitas metode REMD dibandingkan dengan metode MD.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa metode REMD mampu untuk mengambil contoh lebih banyak ruang konformasi dibandingkan metode MD dalam waktu simulasi lebih pendek. Namun demikian, kita harus mempertimbangkan pada struktur awal untuk REMD di mana *snapshot* pada 310 ns memberikan pertukaran replika yang lebih baik selama simulasi. Analisa perubahan struktur sekunder menunjukkan bahwa pada replika 200 K terjadi perubahan struktur sekunder yang tidak terlalu signifikan (tidak terjadi banyak perubahan) dibandingkan pada replika 342 K. Hal tersebut menunjukkan bahwa proses denaturasi yang melibatkan banyak perubahan konformasi mungkin diamati dengan menggunakan metode REMD.

ABSTRACT

Study on an application of REMD (Replica Exchange Molecular Dynamics) method to enhance p53 protein conformational sampling has been conducted. A correct protein conformational sampling is needed to determine the stability of the conformation. The conformational stability of protein is important for its function. Conformational sampling process can be performed with MD simulation method, REMD, and many others. This research was carried out with REMD module in AMBER11 software package. Wild-type p53 protein (PDB code: 1TSR) was simulated by 140 ps per replica, started from equilibration step and it was compared with 60 ps per replica of REMD trajectories started from p53 MD snapshot at 310 ns. This research was focused to understand the effectivity of REMD method compared by MD method.

Results reveal that REMD method was able to sample more conformational space than MD method in shorter simulation time. Nevertheless, we should consider on the initial structure for REMD as the 310 ns snapshots gave a better exchange on its replica during the simulation. The pattern of structure change analysis showed that on 200 K replica there was a slight change of secondary structure (not much change) compared to 342 K replica. It reveals that denaturation process, which is involving many conformational changes might be observed by using REMD method.